HAL open science

De la mécanique statistique hors équilibre aux équations de transport

R. Balian

▶ To cite this version:

R. Balian. De la mécanique statistique hors équilibre aux équations de transport. École thématique. Ecole Joliot Curie "Noyaux en collisions", Maubuisson, (France), du 11-16 septembre 1995 : 14ème session, 1995. cel-00650110

HAL Id: cel-00650110

https://cel.hal.science/cel-00650110v1

Submitted on 9 Dec 2011

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

De la mécanique statistique hors équilibre aux équations de transport

Roger BALIAN

CEA/SPhT, CE Saclay, 91191 Gif sur Yvette Cedex, France

RESUME: Ces notes de cours présentent une vue synthétique sur les fondements de la mécanique statistique hors équilibre. Le but est d'établir les équations de transport satisfaites par les variables pertinentes en partant de la dynamique microscopique. On introduit pour cela la représentation de Liouville, et la projection qui associe à tout opérateur densité, pour un choix donné d'observables pertinentes, un opérateur densité réduit. On en déduit une équation intégro-différentielle exacte pour les variables pertinentes. Une approximation de mémoire courte fournit alors les équations de transport. A chaque niveau de description est associée une entropie pertinente caractérisant la finesse de la description. L'exemple du gaz classique, avec ses trois niveaux de description et avec la méthode de Chapman-Enskog, illustre l'exposé.

ABSTRACT: These lecture notes give a synthetic view on the foundations of non-equilibrium statistical mechanics. The purpose is to establish the transport equations satisfied by the relevant variables, starting from the microscopic dynamics. The Liouville representation is introduced, and a projection associates with any density operator, for a given choice of relevant observables, a reduced density operator. An exact integro-differential equation for the relevant variables is thereby derived. A short-memory approximation then yields the transport equations. A relevant entropy which characterizes the coarseness of the description is associated with each level of description. As an illustration, the classical gas, with its three levels of description and with the Chapman-Enskog method, is discussed.

Plusieurs parties de ce cours ont déjà fait l'objet, sous une forme ou sous une autre, de publications. En particulier, son contenu figure de manière plus ou moins approfondie aux chapitres 2, 14 et 15 du traité cité en ref.[1]. Deux cours sur des sujets voisins ont été donnés à l'Ecole de Cargèse[2,3]. Pour plus de détails sur la méthode de projection et ses extensions, partie centrale du présent cours, on pourra se reporter à deux articles de revue[4,5] et à leurs bibliographies. Nous nous bornerons ici à un exposé des idées générales, en n'incluant de détails techniques que sur les points non publiés.

1 Niveaux de description

La description microscopique d'un système physique permet de caractériser, tout au moins statistiquement, l'évolution de toutes les grandeurs imaginables. Au niveau macroscopique, on ne suit que certaines grandeurs, dont l'évolution est régie par des lois empiriques (équation de Fourier, décrivant le transport de la chaleur, pour la densité locale d'énergie, par exemple). La mécanique statistique vise à justifier ces lois en les déduisant de la dynamique microscopique.

Pour un *gaz classique*, exemple qui nous servira d'illustration tout au long de l'exposé[1)], le *niveau microscopique* est décrit par la densité de probabilité dans l'espace des phases à $6N$dimensions, qui évolue selon l'équation de Liouville, conséquence des équations de Hamilton. Le *niveau macroscopique* (ou *hydrodynamique*) est décrit par les densités de particules $\rho_N(\mathbf{r})$, d'énergie $\rho_E(\mathbf{r})$ et de moment $\rho_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ dans l'espace ordinaire. Leur évolution est régie par les équations de conservation, couplées avec les équations de la thermostatique, et par les équations empiriques linéaires entre densités de courant (flux) et gradients des variables intensives (affinités); ces équations se résument ici en la loi de Fourier et la loi de viscosité de Newton. La description hydrodynamique ne convient pas lorsque l'équilibre local n'est pas établi; il convient alors de travailler au *niveau de Boltzmann*, intermédiaire. La description de Boltzmann repose sur la densité réduite à un corps (dans l'espace des phases à 6 dimensions), qui évolue selon l'équation de Boltzmann.

Les *échelles spatiales* caractéristiques de chaque description sont respectivement: la portée des forces, la distance sur laquelle les densités hydrodynamiques varient significativement, le libre parcours (ou les distances interparticules). Les *échelles temporelles* sont: la durée d'une collision, le temps sur lequel les densités hydrodynamiques varient significativement, le délai entre collisions successives d'une particule. Ces échelles doivent *différer suffisamment* pour valider la description hydrodynamique ou la description de Boltzmann, comme on le verra plus loin. Les lois de conservation sont un goulot d'étranglement qui permet aux densités hydrodynamiques d'évoluer lentement, ce qui autorise à la description hydrodynamique d'avoir un large domaine de validité pratique. En physique nucléaire, l'impossibilité de distinguer nettement des échelles spatiales en raison de la taille finie des noyaux implique que toute description macroscopique est plus ou moins approchée, et qu'il n'existe pas de choix indiscutable de variables macroscopiques.

A chaque niveau de description correspondent des échelles caractéristiques, un choix de *variables pertinentes* (pouvant s'exprimer statistiquement en termes des variables du niveau le plus microscopique), une *entropie* fonction de ces variables (d'autant plus grande que la description est plus grossière), des *variables conjuguées* définies comme dérivées partielles de l'entropie, et des *lois dynamiques*. Les propriétés qualitatives de ces dernières peuvent changer d'un niveau à l'autre:

non-linéarité (permettant l'existence de solitons ou de chaos), caractère *classique* (même lorsque la théorie microscopique sous-jacente est quantique comme en physique nucléaire), *irréversibilité.*

2 Description microscopique

Elle repose sur l'*opérateur densité* D du système, de trace unité, hermitien et non-négatif, qui évolue selon l'*équation de Liouville–von Neumann*

$$\frac{dD}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[H, D]. \tag{2.1}$$

L'*entropie de von Neumann* ($k = 1$),

$$S \equiv -\operatorname{Tr} D \ln D, \tag{2.2}$$

mesure le *désordre* ou le *manque d'information* associés à chaque D; sa forme résulte de l'additivité de l'information. Elle reste constante au cours de l'évolution (2.1). Ceci exprime que l'on ne perd pas d'information au cours du temps si l'on connaît le hamiltonien . (Il est commode d'étendre aux D non normalisés cette définition, selon $S(D) = \operatorname{Tr} D\ (1 - \ln D) - 1$.) La donnée de D équivaut à celle de la *correspondance* (linéaire) entre les *observables* A et leurs *espérances*

$$\langle A \rangle = \operatorname{Tr} A\, D, \tag{2.3}$$

identifiées aux grandeurs physiques. Celles-ci évoluent selon le théorème d'Ehrenfest, conséquence de (2.1).

Plutôt que de considérer les *observables* comme des *matrices* A_{mn} et les *opérateurs densité* comme des *matrices* D_{nm} de l'espace de Hilbert, on a avantage à introduire les *représentations de Liouville,* qui consistent à les considérer comme des *vecteurs* A_μ et D^μ de deux espaces vectoriels duaux[1]. En termes d'une base complète d'observables Ω^μ linéairement indépendantes, toute *observable* s'écrit ainsi (avec la convention de sommation sur les indices répétés)

$$A = A_\mu\, \Omega^\mu. \tag{2.4}$$

Tout *état* D est caractérisé par ses coordonnées

$$D^\mu \equiv \langle \Omega^\mu \rangle, \tag{2.5}$$

données dans la représentation d'espace de Hilbert par $\operatorname{Tr} \Omega^\mu D$. Si l'on définit, dans l'espace vectoriel des états, la base Σ_μ biorthogonale aux Ω^μ selon:

$$\operatorname{Tr} \Omega^\mu \Sigma_{\mu'} = \delta^\mu_{\mu'}, \tag{2.6}$$

$$\Sigma_\mu \Omega^\mu = \mathcal{J}, \tag{2.7}$$

où $\mathcal{J}$ désigne l'unité dans l'espace de Liouville, on peut développer D en

$$D = D^\mu \Sigma_\mu = \langle \Omega^\mu \rangle \, \Sigma_\mu, \tag{2.8}$$

et la *moyenne* (2.3) s'écrit comme un *produit scalaire*

$$\langle A \rangle = A_\mu \, D^\mu \equiv (A \, ; D). \tag{2.9}$$

L'*algèbre* des observables est caractérisée dans la représentation de Liouville par les constantes de structure apparaissant dans les relations de produit et d'hermiticité conjuguée:

$$\Omega^\mu (\Omega^\nu)^\dagger = C_\rho^{\mu\nu} \Omega^\rho = \left(C_\rho^{\nu\mu} \right)^* (\Omega^\rho)^\dagger . \tag{2.10}$$

L'*évolution* (2.1), opération linéaire sur D, s'exprime selon

$$\frac{dD^\mu}{dt} = \mathcal{L}^\mu{}_\nu \, D^\nu, \tag{2.11}$$

à l'aide du *liouvillien* $\mathcal{L}$, opérateur dans l'espace de Liouville, appelé superopérateur pour le distinguer des observables et des opérateurs densité dans l'espace de Hilbert. Dans l'image de Heisenberg, les coordonnées A_μ des observables varient de même selon

$$\frac{dA_\mu}{dt} = A_\nu \mathcal{L}^\nu{}_\mu, \tag{2.12}$$

puisque l'on a dans les deux images l'équation d'Ehrenfest $d \langle A \rangle / dt = (A\mathcal{L}; D) = (A; \mathcal{L}D)$.

Les *représentations* habituelles dans des *espaces de Hilbert* $|m\rangle$ se retrouvent comme des cas particuliers, où μ désigne une paire (m, n) d'indices, et où

$$\begin{aligned} \Omega^\mu &\equiv |m\rangle \langle n| , \quad A_\mu = \langle m| A |n\rangle , \\ D^\mu &= \langle n| D |m\rangle , \quad \Sigma_\mu \equiv |n\rangle \langle m| . \end{aligned} \tag{2.13}$$

Le liouvillien apparaît comme le tenseur à 4 indices:

$$\mathcal{L}^\mu{}_\nu \equiv \mathcal{L}^{mn}{}_{pq} = \frac{1}{i\hbar} \quad [\delta_{mp} \langle n| H |q\rangle - \delta_{nq} \langle p| H |m\rangle] . \tag{2.14}$$

Les représentations de Liouville sont plus générales que les représentations dans des espaces de Hilbert, car elles autorisent des combinaisons linéaires sur l'indice μ, ce qui *mélange les indices des bras et des kets.* Les postulats de la mécanique quantique s'y réexpriment comme suit: (i) les

observables A, qui jouent le rôle de *variables aléatoires*, constituent une *algèbre* non-commutative avec hermiticité conjuguée (C^*–algèbre), caractérisée par (2.4), (2.10); (ii) les *états* D jouent selon (2.9) le rôle de *distributions de probabilité*; ils doivent être tels que $\langle 1 \rangle = 1$, et que pour $A = A^\dagger$ l'espérance soit réelle et la variance non-négative (ceci s'exprime par la positivité de la matrice $C^{\mu\nu}_\rho D^\rho$); (iii) l'*évolution* hamiltonienne est régie par (2.11), où $\mathcal{L}$ doit *préserver les relations d'algèbre* (2.10), ce qui lui impose d'être équivalent à (2.14).

Un exemple courant est la représentation de polarisation pour un *spin* 1/2, où l'on prend comme base Ω^μ les trois opérateurs de Pauli et l'opérateur unité. Un état D est alors représenté non plus par une matrice densité 2×2 mais par le vecteur polarisation $\langle \vec{\sigma} \rangle$, réel et de longueur inférieure ou égale à 1. Le liouvillien (2.11) est (à une constante multiplicative près) le produit vectoriel par le champ magnétique.

La *représentation de Wigner* (décrite ici seulement pour une particule à une dimension) est une représentation de Liouville, où $\mu = (x, p)$ désigne une paire d'indices continus, et la sommation sur μ une intégration (avec la mesure habituelle $dx\ dp/h$). Les vecteurs de base associés,

$$\Omega(x,p) \equiv \int \frac{d\alpha\ d\beta}{h} \exp \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \left[\alpha\,(\hat{x} - x) + \beta\,(\hat{p} - p)\right] \equiv \Sigma\,(x,p)\,. \tag{2.15}$$

sont repérés par un point (x, p) de l'espace des phases, et sont des opérateurs à travers les observables $\hat{x}$ et $\hat{p}$. Celles-ci satisfont à $[\hat{x}, \hat{p}] = \mathrm{i}\hbar$. Elles deviennent des variables aléatoires ordinaires à la limite classique; alors $\Omega\ (x,p)$ se réduit à $h\,\delta\,(\hat{x} - x)\,\delta\,(\hat{p} - p)$ et engendre selon (2.17) la densité de probabilité au point (x, p) de l'espace des phases (avec la mesure $dx\ dp\,/\,h$ qui remplace la trace). La représentée de Wigner de A, cas particulier de (2.4), s'écrit

$$A = \int \frac{dx\ dp}{h} A_{\mathrm{W}}(x,p)\ \Omega(x,p), \qquad A_{\mathrm{W}}(x,p) \equiv \mathrm{Tr}\ \Omega(x,p) A, \tag{2.16}$$

tandis que (2.5) et (2.9) deviennent

$$D_{\mathrm{W}}(x,p) \equiv \langle \Omega(x,p) \rangle = \mathrm{Tr}\ \Omega(x,p) D, \tag{2.17}$$

$$\langle A \rangle = \int \frac{dx\ dp}{h} A_{\mathrm{W}}(x,p)\ D_{\mathrm{W}}(x,p). \tag{2.18}$$

(On retrouve la présentation habituelle de la représentée de Wigner en écrivant (2.15) en représentation x, et en utilisant l'identité $\mathrm{e}^{\lambda\hat{x} + \mu\hat{p}} = \mathrm{e}^{\lambda\hat{x}} \mathrm{e}^{\mu\hat{p}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\lambda\mu\hbar/2}$ dans (2.16).) La seule différence avec le formalisme classique réside dans les relations d'algèbre (2.10), qui s'écrivent

$$\Omega\,(x,p)\ \Omega\,(x',p') = 4 \int \frac{dx''\ dp''}{h}\ \Omega\,(x'',p'') \exp \frac{2\mathrm{i}}{\hbar} \begin{vmatrix} 1 & x & p \\ 1 & x' & p' \\ 1 & x'' & p'' \end{vmatrix}, \tag{2.19}$$

et $\Omega(x,p)^\dagger = \Omega(x,p)$, alors que pour un système classique le second membre de (2.19) se réduit à $\Omega(x,p)\, h\delta(x-x')\,\delta(p-p')$. En conséquence, la positivité des fluctuations s'exprime par le fait que $D_{\mathrm{W}}(x,p)$ doit être tel que la matrice en $(x,p),(x',p')$,

$$\int \frac{dx''dp''}{h} D_{\mathrm{W}}(x'',p'') \cos\frac{2}{\hbar}\begin{vmatrix} 1 & x & p \\ 1 & x' & p' \\ 1 & x'' & p'' \end{vmatrix}, \tag{2.20}$$

soit positive. Pour des distributions qui varient lentement sur des cellules $\Delta x\ \Delta p \sim h$, ceci équivaut à la positivité de la fonction $D_{\mathrm{W}}(x,p)$. Dans cette limite classique, $D_{\mathrm{W}}(x,p)$ s'interprète comme densité de probabilité ordinaire avec pour mesure $dx\, dp/h$, tandis que $\mathcal{L}$ devient l'opérateur de Liouville classique $\frac{\partial H}{\partial x}\frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial H}{\partial p}\frac{\partial}{\partial x}$.

Plus généralement, une *limite classique* correspond à une situation physique où l'on peut se limiter à ne considérer que des états pour lesquels les observables d'intérêt constituent une sous-algèbre presque commutative de (2.19). Il peut donc exister diverses limites classiques, décrites commodément par des représentations de Liouville différentes. Par exemple, l'électrodynamique quantique a deux limites classiques opposées (et contradictoires), celle du champ électromagnétique, onde classique, et celle des photons, particules semi-classiques. On distinguera aussi la limite $\Delta x\ \Delta p \gg h$ de la limite de basse densité où le principe de Pauli ne joue plus.

Les représentations de Liouville non seulement se prêtent bien aux approximations semi-classiques, mais permettent aussi de décrire des *évolutions non hamiltoniennes*, par exemple aléatoires, donnant lieu à une relaxation, ou concernant un système non isolé. En effet, (2.11) s'intègre en $D(t) = \mathrm{e}^{\mathcal{L}t}D(0)$, au lieu de $D(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}Ht/\hbar}D(0)\mathrm{e}^{\mathrm{i}Ht/\hbar}$ en représentation d'espace de Hilbert. Bien que ces expressions soient équivalentes, la forme plus simple de la première permet des manipulations commodes: on peut ainsi prendre formellement une moyenne sur une évolution aléatoire, en calculant la moyenne de $\mathrm{e}^{\mathcal{L}t}$, ou encore une trace partielle. On peut aussi décomposer $\mathcal{L}$ en $\mathcal{L} = \mathcal{L}_0 + \mathcal{L}_1$ où $\mathcal{L}_0$ est non hamiltonien, irréductible à une forme (2.14) alors que $\mathcal{L}$ l'est. L'élimination de degrés de liberté que nous allons effectuer ci-dessous repose sur ce genre de manipulations, et suppose donc l'emploi des représentations de Liouville.

Dans notre exemple du *gaz classique*, une approche probabiliste directe, ou bien une limite classique prise dans la représentation de Wigner pour N particules, conduisent à représenter l'état par la *densité en phase* $D(\mathbf{r}_1,\mathbf{p}_1 ... \mathbf{r}_N,\mathbf{p}_N)$, fonction de $6N$ variables, symétrique dans l'échange des particules. L'entropie microscopique (2.2) associée s'écrit

$$S(D) = -\int d\tau_N D \ln D, \quad d\tau_N \equiv \frac{1}{N!}\prod_{i=1}^{N}\frac{d^3\mathbf{r}_i\, d^3\mathbf{p}_i}{h^3}, \tag{2.21}$$

et l'espérance (2.9) d'une observable classique, fonction $A(\mathbf{r}_1, \mathbf{p}_1 ..., \mathbf{r}_N, \mathbf{p}_N)$ des variables dynamiques aléatoires, vaut $\langle A \rangle = \int d\tau_N AD$. Il est naturel de classer ces observables classiques selon leur degré de complexité. On introduit ainsi une base d'observables à un, deux, ... corps, définie par

$$\Omega_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \sum_i \delta^3(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})\, \delta^3(\mathbf{p}_i - \mathbf{p}), \tag{2.22}$$

$$\begin{aligned} \Omega_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') &\equiv \sum_{i \neq j} \delta^3(\mathbf{r}_i - \mathbf{r})\, \delta^3(\mathbf{p}_i - \mathbf{p})\, \delta^3(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}')\, \delta^3(\mathbf{p}_j - \mathbf{p}') \qquad (2.23) \\ &= \Omega_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})\, \Omega_1(\mathbf{r}', \mathbf{p}') - \Omega_1(\mathbf{r}, \mathbf{p})\, \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\, \delta^3(\mathbf{p} - \mathbf{p}'), \ldots . \end{aligned}$$

Les variables $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, $(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}',), ...$ désignent des points dans les espaces des phases à 1 corps, 2 corps, ..., alors que les $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i$ sont des variables aléatoires associées aux diverses particules indexées par i. Les espérances (2.5) de ces observables $\Omega_1, \Omega_2, ...$, qui sont elles-mêmes aléatoires à travers les $\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i$,

$$f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \equiv \langle \Omega_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \rangle = \int d\tau_N\, \Omega_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}) D, \tag{2.24}$$

$$f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') \equiv \langle \Omega_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') \rangle, ..., \tag{2.25}$$

sont les *densités réduites à un, deux, ... corps* associées à la densité en phase D; leur donnée équivaut à celle de D, conformément à (2.8), ou encore à celle de la fonctionnelle génératrice

$$\begin{aligned} F\{\xi(\mathbf{r}, \mathbf{p})\} &\equiv \left\langle \prod_i [1 + \xi(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)] \right\rangle = 1 + \int \xi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) d\tau_1 + \\ &+ \int \xi(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \xi(\mathbf{r}', \mathbf{p}') f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') d\tau_2 + ..., \qquad (2.26) \end{aligned}$$

où $\xi(\mathbf{r}, \mathbf{p})$ est une fonction arbitraire, technique commode pour la manipulation globale des densités réduites. Dans cette base, l'équation de Liouville (2.11) s'écrit explicitement, pour un potentiel à deux corps $\sum_{i>j} W(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$, sous la forme

$$\frac{\partial f(\mathbf{r}, \mathbf{p})}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = \int d^3\mathbf{r}'\, d^3\mathbf{p}'\, \nabla_{\mathbf{r}} W(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \nabla_{\mathbf{p}} f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}'), \tag{2.27}$$

$$\frac{\partial f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}')}{\partial t} + \left(\frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{\mathbf{p}'}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \right) f_2 = ... \tag{2.28}$$

d'une *hiérarchie, dite BBGKY*, d'équations couplant successivement f à f_2, f_2 à f_3, etc. Cette hiérarchie s'écrit aussi en termes des cumulants $g, g_2, ...$ de ces densités réduites, définis soit de proche en proche par $f \equiv g$, $f_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}') \equiv g(\mathbf{r}, \mathbf{p})\, g(\mathbf{r}', \mathbf{p}') + g_2(\mathbf{r}, \mathbf{p}, \mathbf{r}', \mathbf{p}'), ...$, soit en notant

que la fonctionnelle génératrice des $g, g_2, \ldots$ est le logarithme de (2.26). L'approximation de troncature $g_2 = 0$ dans la première équation de la hiérarchie est l'*équation de Vlasov.*

En mécanique statistique quantique, les observables à un corps (2.22) sont remplacées par l'ensemble des $\psi_m^\dagger \psi_n$, ou encore par les transformées de Wigner de celles-ci dans l'espace de Fock,

$$\Omega_1(\mathbf{r},\mathbf{p}) \equiv \sum_{mn} \psi_m^\dagger \langle m| \int \frac{d^3\boldsymbol{\alpha}\, d^3\boldsymbol{\beta}}{h^3} \exp \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [\boldsymbol{\alpha}\cdot(\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}) + \boldsymbol{\beta}\cdot(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p})] |n\rangle \psi_n; \quad (2.29)$$

les opérateurs $\hat{\mathbf{x}}$ et $\hat{\mathbf{p}}$ agissent sur les kets à un corps $|m\rangle$, et Ω_1 est un opérateur dans l'espace de Fock à travers $\psi_m^\dagger \psi_n$. Aux ordres suivants, (2.23) est remplacé par les produits normaux

$$\Omega_2(\mathbf{r},\mathbf{p},\mathbf{r}',\mathbf{p}') = :\Omega_1(\mathbf{r},\mathbf{p})\,\Omega_1(\mathbf{r}',\mathbf{p}'):, \ldots \quad . \qquad (2.30)$$

Une hiérarchie analogue à la hiérarchie BBGKY, en termes de $\rho(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \langle \Omega_1(\mathbf{r},\mathbf{p})\rangle$, $\rho_2 = \langle \Omega_2 \rangle, \ldots$, peut remplacer l'équation de Liouville–von Neumann (2.1) ou (2.11), et sa troncature est l'*équation TDHF* (en représentée de Wigner).

3 Contraction de la description

Une description macroscopique est caractérisée par un *choix d'observables pertinentes*

$$\omega^i \equiv \omega^i_\mu \Omega^\mu, \qquad (3.1)$$

en nombre beaucoup plus faible que l'ensemble des Ω^μ, toutes les autres observables étant écartées. Si le système est décrit à l'échelle microscopique par l'opérateur densité D, les *variables dynamiques macroscopiques* à l'instant considéré s'identifient aux *espérances*

$$\rho^i \equiv \left\langle \omega^i \right\rangle = \omega^i_\mu D^\mu \qquad (3.2)$$

de ces observables pertinentes ω^i. La contraction de la description est le passage des coordonnées D^μ définies par (2.5), en nombre immense, impraticables et peu intelligibles, aux variables macroscopiques ρ^i. Selon le contexte, celles-ci peuvent être aussi désignées comme variables *collectives*, variables *pertinentes*, variables *lissées* ("coarse-grained"), etc. Pour des systèmes infinis, la fluctuation statistique de ω^i est éventuellement négligeable, de sorte que le passage du microscopique au macroscopique peut faire disparaître le caractère statistique des ρ^i.

Le nombre et la nature des observables pertinentes ω^i dépend du système physique, des conditions dans lesquelles il est préparé, du degré de précision souhaité. Il faut y inclure toutes les observables expérimentalement accessibles et toutes les observables *conservatives*, qui ne varient

pas dans le temps. Il convient aussi d'y inclure les observables *variant lentement*, par exemple les *variables thermodynamiques locales*, qui évoluent moins vite que les autres car leur variation nécessite un transfert d'énergie, de particules ou de moment d'un point à un point voisin. Au cas où des invariances sont spontanément brisées, de façon exacte ou approchée, les *paramètres d'ordre* globaux ou locaux doivent figurer aussi parmi les ω^i. Mais il n'existe pas de recette a priori pour effectuer le choix des ω^i, qui est justifié en dernier ressort par le succès de la description réduite correspondante. Nous nous limiterons dans la suite à un choix des ω^i fixé a priori; il est possible [4)] d'étendre le formalisme à des cas où le choix même des observables collectives ω^i dépendrait de l'état D du système. D'autres extensions, ainsi que de nombreux détails sur les sections qui suivent, peuvent aussi être trouvés dans l'article [4)].

Par exemple, dans la *description de Boltzmann* d'un gaz classique, les ω^i sont les observables $\Omega_1(\mathbf{r},\mathbf{p})$ définies par (2.22), l'index i désignant le point $(\mathbf{r},\mathbf{p})$ de l'espace des phases à un corps; les variables dynamiques pertinentes ρ^i sont les *densités réduites à un corps* (2.24), tandis que l'on écarte toute l'information sur les densités réduites (2.23), (2.25) à plus d'un corps. La mécanique statistique hors équilibre a alors pour tâche de démontrer approximativement l'équation de Boltzmann pour $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$ en partant de la hiérarchie (2.27), (2.28) et en éliminant $f_2, f_3, \ldots$, ou encore de construire une équation de Boltzmann généralisée plus exacte, lorsque le libre parcours n'est pas très supérieur à la portée des forces. De même, dans la *description hydrodynamique* du gaz classique, les variables dynamiques $\rho_N(\mathbf{r}), \rho_E(\mathbf{r}), \rho_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ s'expriment en fonction de la densité en phase comme des moyennes de variables aléatoires; elles s'expriment aussi en fonction de $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$ sous forme d'intégrales sur $\mathbf{p}$:

$$\rho_N(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{p} f, \quad \rho_E(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{p} \frac{p^2}{2m} f, \quad \rho_{\mathbf{P}}(\mathbf{r}) = \int d^3\mathbf{p}\, \mathbf{p}\, f\,. \qquad (3.3)$$

Ici encore la dynamique de ces variables doit se déduire de l'équation de Liouville.

Alors que l'ensemble des D^μ microscopiques constitue une description *statistique complète*, fournissant selon (2.9) l'espérance de toute grandeur, les ρ^i macroscopiques fournissent une description *incomplète*, ne donnant aucune indication sur les observables qui ne sont pas des combinaisons linéaires des ω^i. Ces combinaisons sont représentées par le plan hachuré sur la fig.1, où l'on a visualisé l'espace de Liouville des observables. Dans l'espace de Liouville des états (fig.2), un état microscopique D, de coordonnées D^μ, est représenté par *un point*. Une description macroscopique incomplète, où seules les variables (3.2) sont données, correspond à la donnée d'*un plan* Δ, dont la codimension est la dimension de l'espace des ω^i, puisque seules les contraintes (3.2) sur les D^μ sont données.

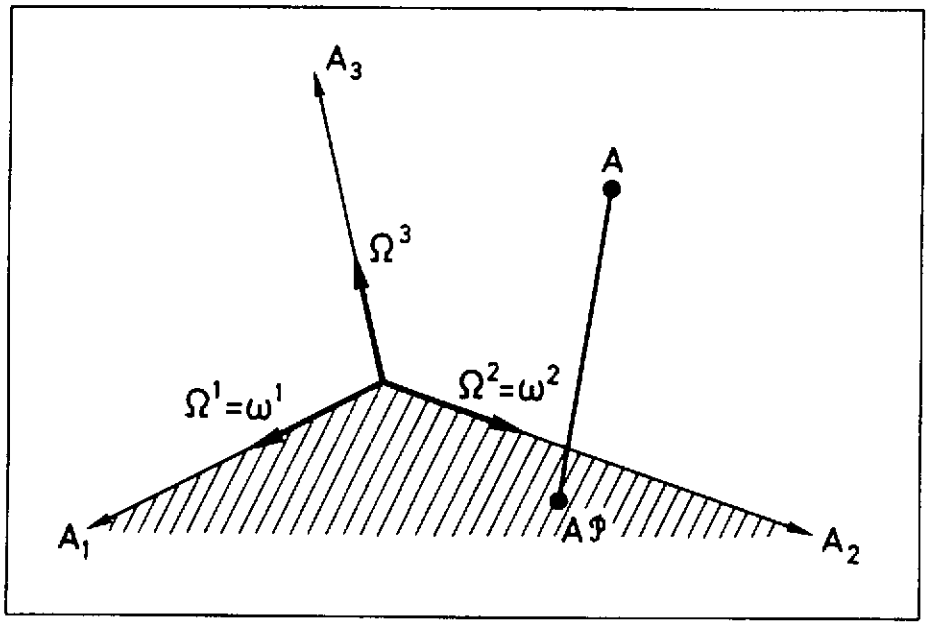

Figure 1. *L'espace des observables.* Toute observable (2.4) est visualisée comme un point dans l'espace vectoriel sous-tendu par la base Ω^μ. Le sous-espace des observables pertinentes est un plan, sous-tendu par la base ω^i. (On a choisi ici deux observables pertinentes ω^1 et ω^2, égales respectivement à Ω^1 et Ω^2.) La projection (4.8) qui fait passer de A à $A\mathcal{P}$ est orthogonale pour la métrique (4.9) prise au point D_0.

La correspondance $D \to \rho^i$ entre variables microscopiques est macroscopiques est réalisée par les éqs. (3.2). Posons-nous le *problème inverse.* Supposons qu'à un instant donné, seules les variables macroscopiques ρ^i soient connues. Quel opérateur densité D_0, c'est-à-dire quelle loi de probabilité à l'échelle microscopique, doit-on alors attribuer au système ? Cet opérateur densité doit évidemment satisfaire aux *contraintes* (3.2). Nous souhaitons de plus que les prédictions qu'il nous fournit sur les observables autres que les ω^i ne soient pas biaisées. Un tel choix de D_0 est fourni de manière unique par le critère d'*entropie maximale*, postulat de nature statistique qui s'énonce comme suit [1]. L'entropie de von Neumann (2.2) associe à tout opérateur densité D un nombre $S(D)$, qui mesure l'information qui manque à l'échelle microscopique lorsque le système est décrit de manière probabiliste par D. Ce nombre, nul pour un état pur, maximal lorsque tous les kets sont équiprobables, est une mesure naturelle du biais, qui est d'autant plus grand que $S(D)$ est plus faible. L'état D_0 *le moins biaisé* associé à un ensemble de variables ρ^i est alors celui qui rend maximal $S(D)$, compte tenu des contraintes $D^\mu\ \omega^i_\mu = \rho^i$. Tout autre état D satisfaisant aux mêmes contraintes contiendrait en effet plus d'information que D_0, et cette information concernerait les variables non pertinentes, sur lesquelles nous avons justement

supposé que rien n'était connu. Géométriquement (fig.2), le point D_0 est celui qui rend la fonction $S(D)$ maximale dans le plan Δ.

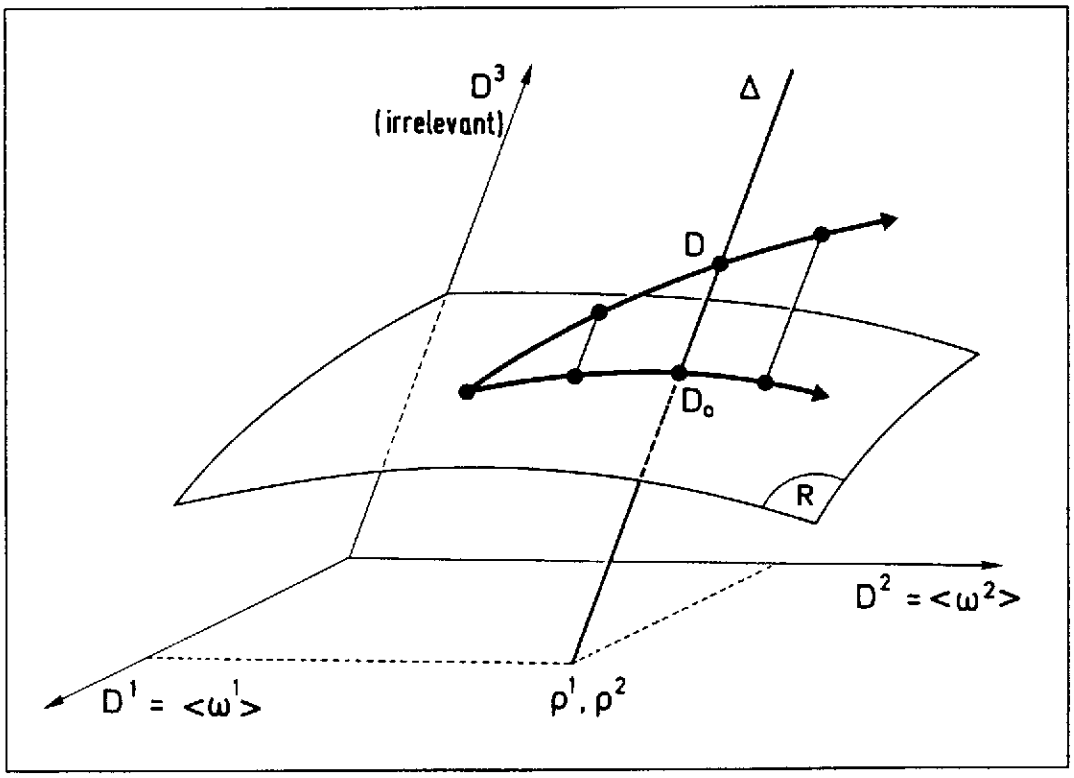

Figure 2. *L'espace des états.* La connaissance des variables macroscopiques (3.2) caractérise un plan Δ, mais ne suffit pas à déterminer un état D. Parmi les divers points D de Δ, équivalents en ce qui concerne la valeur des ρ^i mais pas pour l'espérance $\langle A \rangle = A_\mu D^\mu$ d'une observable A arbitraire, le critère d'entropie maximale détermine un opérateur densité privilégié D_0, non biaisé. Si l'on fait varier les ρ^i arbitrairement, le point D_0 décrit une surface R, la surface (3.4) des états réduits non biaisés (la figure est schématique; en réalité la surface R est formée de droites passant par l'origine). La correspondance $D \rightarrow \rho^i \longleftrightarrow D_0$ est une projection, orthogonale pour la métrique engendrée par l'entropie, Δ et R étant perpendiculaires en D_0. Lorsque le temps s'écoule, D décrit une trajectoire régie par l'équation de Liouville–von Neumann (2.11), et la trajectoire correspondante de D_0 est donnée par les équations de transport généralisées (4.20).

La recherche de ce maximum s'effectue explicitement en associant un *multiplicateur de Lagrange* λ_i à chaque contrainte $\mathrm{Tr}\, D\omega^i = \rho^i$, ce qui fournit compte tenu de $\delta S = -\mathrm{Tr}\delta D \ln D$:

$$D_0 = \exp\left[-\lambda_i\, \omega^i\right]; \tag{3.4}$$

la normalisation de D_0 est assurée en incluant dans l'ensemble des ω^i l'opérateur unité $\omega^0 =$

1, avec $\rho^0 = 1$. Les multiplicateurs λ_i sont liés aux espérances ρ^i par

$$\rho^i = -\frac{\partial}{\partial \lambda_i} \mathrm{Tr} \exp\left[-\lambda_j\, \omega^j\right], \tag{3.5}$$

et la valeur de l'entropie $S(D_0)$ est une fonction des ρ^i (ou des λ_i) donnée par

$$S_{\mathrm{R}}(\rho) = \lambda_i\, \rho^i + \mathrm{Tr} \exp\left[-\lambda_j\, \omega^j\right] - 1; \tag{3.6}$$

les deux derniers termes se compensent dans le cas physique où D_0 est normalisé ($\rho^0 = 1$). La fonction $S_{\mathrm{R}}(\rho)$ définit une entropie associée non pas à un opérateur densité microscopique comme l'entropie de von Neumann, mais aux seules variables réduites macroscopiques ρ^i. En définitive, il existe une *relation biunivoque entre* $D_0 \longleftrightarrow \rho^i \longleftrightarrow \lambda_i$, donnée par (3.4), (3.5). Lorsque les ρ^i (ou les λ_i) varient, D_0 décrit dans l'espace des états (fig.2) une surface R paramétrisée par (3.4), et $S(D_0) = \max_\Delta S(D) = S_{\mathrm{R}}(\rho)$ est donnée par (3.6).

Cette construction nous a permis d'introduire l'*entropie pertinente* (3.6) *relative à la description réduite aux variables* ρ^i. Elle mesure la quantité d'information qui manque lorsque *seules* ces variables ρ^i sont connues. Si D est un opérateur densité équivalent à D_0 en ce qui concerne les variables $\rho^i, S(D_0) - S(D)$ mesure la quantité d'information contenue dans D en ce qui concerne les variables non pertinentes. La *réduction* de la description, depuis l'état microscopique D vers les variables ρ^i, *fait croître l'entropie,* depuis l'entropie de von Neumann microscopique $S(D)$ jusqu'à l'entropie pertinente $S_{\mathrm{R}}(\rho)$ relative à ces variables. Cette croissance mesure la *perte d'information* due au fait que l'on a écarté des variables considérées comme non pertinentes.

Les relations (3.5), (3.6) impliquent que

$$dS_{\mathrm{R}}(\rho) = \lambda_i\, d\rho^i. \tag{3.7}$$

(C'est pour donner à (3.5), (3.6) la forme d'une transformée de Legendre que l'on a introduit des opérateurs D_0 non normalisés.) Les multiplicateurs λ_i apparaissent ainsi comme des *variables conjuguées* des ρ^i par rapport à l'entropie pertinente. Cette propriété étend à la mécanique statistique hors équilibre une propriété bien connue en thermostatique.

Dans l'exemple du gaz classique (fig.3), la réduction associée à la *description de Boltzmann* fait passer de la densité en phase microscopique D à la densité réduite à un corps $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$. Les densités en phase D_0 non biaisées associées aux $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, notées D_{B}, sont celles où la composante de D_{B} pour chaque N est *factorisée* en un produit $\exp\left[-\sum_i \lambda(\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i)\right]$. L'entropie pertinente $S_{\mathrm{R}} \equiv S_{\mathrm{B}}$ correspondant à cette description est une fonctionnelle de $f(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, définie par

$$S_{\mathrm{B}}(f) = \int \frac{d^3\mathbf{r}\, d^3\mathbf{p}}{h^3} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}) \left[1 - \ln h^3 f(\mathbf{r}, \mathbf{p})\right], \tag{3.8}$$

et identifiée à des constantes additive et multiplicative près à l'entropie H introduite par Boltzmann. L'équation (3.5) s'écrit $f(\mathbf{r},\mathbf{p}) = h^{-3}\exp\left[-\lambda\left(\mathbf{r},\mathbf{p}\right)\right]$. Dans la *description hydrodynamique* ou thermodynamique, une réduction supplémentaire a mené aux cinq densités $\rho_N, \rho_E, \rho_{\mathbf{P}}$. Les densités en phase D_0 non biaisées, notées D_{th}, qui correspondent à ces cinq densités hydrodynamiques ont la forme d'un *équilibre local* grand canonique; on peut aussi les caractériser par des densités réduites à un corps $f_0(\mathbf{r},\mathbf{p})$, exponentielles d'un polynôme de second degré en les composantes de $\mathbf{p}$, avec cinq coefficients λ_i (voir plus bas l'éq.(6.1)). L'entropie pertinente $S_{\text{th}}(\rho)$ correspondante est l'intégrale sur tout l'espace de la densité d'entropie, calculée en fonction des densités $\rho_N(\mathbf{r})$, $\rho_E(\mathbf{r})$, $\rho_{\mathbf{P}}(\mathbf{r})$ *comme en thermostatique.* Les variables λ_i sont reliées à la température locale, au potentiel chimique local, et à la vitesse hydrodynamique locale par l'éq. (6.2).

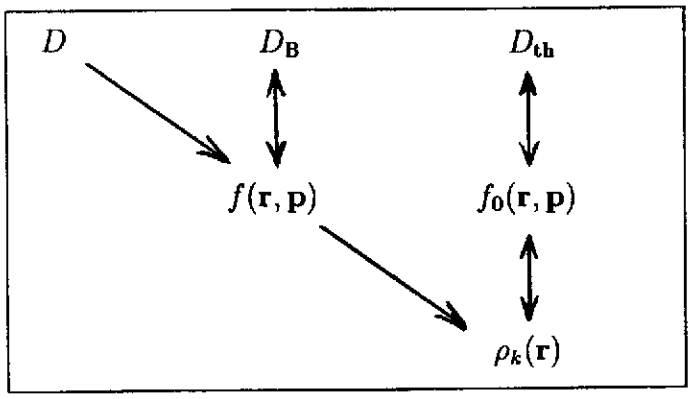

Figure 3. *Les trois niveaux de description d'un gaz,* microscopique (première colonne), de Boltzmann (deuxième colonne), hydrodynamique ou thermodynamique (troisième colonne). La première ligne représente les densités en phase des trois niveaux, la seconde ligne les densités réduites à un corps, la troisième ligne les densités hydrodynamiques (k = nombre de particules, énergie, moment). Les flèches simples marquent la réduction, les flèches doubles l'équivalence par inférence non biaisée.

La construction générale (3.4),(3.5) de D_0 à partir des ρ^i s'applique en particulier à l'*état initial.* La préparation de celui-ci (soit expérimentale, soit théorique) détermine en effet seulement les variables ρ^i que l'on contrôle. En vue de faire des prédictions non biaisées sur les autres variables au temps $t = 0$, ou bien de déterminer les propriétés du système en des temps ultérieurs, il convient de lui attribuer au temps $t = 0$ une distribution de probabilité non biaisée. C'est ce que réalise l'opérateur densité défini par (3.4), (3.5). Sur la figure 2, ceci est visualisé par le fait que la trajectoire de l'état $D(t)$ dans l'espace de Liouville commence en un point $D(0) = D_0(0)$

de la surface R. Cependant, en des instants ultérieurs, l'équation de Liouville–von Neumann fait *sortir $D(t)$ de cette surface.*

Le long de la trajectoire $D(t)$, l'*entropie de von Neumann $S(D(t))$ reste constante:* l'information totale ne varie pas. En revanche, l'*entropie pertinente $S_{\mathrm{R}}(\rho(t))$* associée *croît* en général, puisque $S(D_0(t)) \geq S(D(t))$ par construction même de $D_0(t)$: l'information initiale est transférée des degrés de liberté macroscopiques ρ^i vers les autres. L'opérateur densité $D(t)$ comporte en $t \neq 0$ un *biais*, qui traduit la *mémoire* qu'il a conservée de $D_0(0)$ parmi ses parties non pertinentes. L'équation d'évolution (2.1) de $D(t)$ est plus simple que celle de $D_0(t)$, mais elle fait intervenir parmi toutes les prédictions concevables des informations non macroscopiques que nous souhaitons écarter. La dynamique d'intérêt, celle de la description incomplète $D_0(t)$ ou des $\rho^i(t)$, doit être obtenue par projection à partir de celle de $D(t)$, et la dissipation décrite par la croissance de $S_{\mathrm{R}}(\rho(t))$ traduit une *fuite d'information vers les variables inaccessibles* que nous avons écartées, fuite due au *couplage* entre variables pertinentes et non pertinentes.

4 La méthode de projection

Nous allons effectuer, explicitement mais formellement, l'opération schématisée sur la fig.2: déduire de la trajectoire de $D(t)$ donnée par (2.1) celle de $D_0(t)$, c'est-à-dire établir les équations du *mouvement des variables macroscopiques $\rho^i(t)$*. On va pour cela relier $D_0(t)$ à $D(t)$ en montrant que le passage de D à D_0 est à chaque instant une projection dans l'espace de Liouville des états.

On introduit d'abord les opérateurs

$$\frac{\partial D_0}{\partial \lambda_j} = -\int_0^1 du\ (D_0)^u\, \omega^j\, (D_0)^{1-u}\,; \tag{4.1}$$

chacun des vecteurs (4.1), de coordonnées $\partial D_0^\mu / \partial \lambda_j$ dans l'espace de Liouville des états, est tangent à la surface R au point D_0. On note que la matrice

$$\begin{aligned} \left(\omega^i; \frac{\partial D_0}{\partial \lambda_j}\right) &= -\int_0^1 du\ \mathrm{Tr}\ \omega^i\, (D_0)^u\, \omega^j\, (D_0)^{1-u} \\ &= -\frac{\partial^2}{\partial \lambda_i\, \partial \lambda_j} \mathrm{Tr}\ \exp\left[-\lambda_k\, \omega^k\right] = \frac{\partial \rho^i}{\partial \lambda_j}, \end{aligned} \tag{4.2}$$

où la dernière égalité résulte de (3.5), est en vertu de (3.7) l'inverse de la matrice

$$\frac{\partial \lambda_j}{\partial \rho^i} = \frac{\partial^2 S_{\mathrm{R}}(\rho)}{\partial \rho^i\, \partial \rho^j}. \tag{4.3}$$

Par suite, les opérateurs σ_i définis par

$$\frac{\partial D_0}{\partial \lambda_j}\, \frac{\partial^2 S_{\mathrm{R}}(\rho)}{\partial \rho^i\, \partial \rho^j} = \frac{\partial D_0}{\partial \rho^i} \equiv \sigma_i \tag{4.4}$$

satisfont à

$$\left(\omega^i\,;\sigma_j\right) = \delta^i_j. \tag{4.5}$$

Tandis que les ω^i sous-tendent le sous-espace des observables pertinentes, les σ_i *sous-tendent le plan tangent à* R *en* D_0 (qui passe par l'origine); ils constituent avec les ω^i une paire de bases *biorthogonales* de ces sous-espaces, de même que les Ω^μ et Σ_μ constituent des bases biorthogonales des espaces entiers d'observables et d'états. L'équation (4.5) apparaît donc comme la *restriction* de la relation d'orthogonalité (2.6) *aux sous-espaces pertinents* d'observables et d'états.

En conséquence, le superopérateur $\mathcal{P}$, défini dans l'espace de Liouville par sa matrice

$$\mathcal{P}^\mu{}_\nu \equiv \sigma^\mu_i\,\omega^i_\nu \tag{4.6}$$

est un *projecteur* puisqu'il satisfait à $\mathcal{P}^2 = \mathcal{P}$. La définition (4.6) de $\mathcal{P}$ est la restriction aux sous-espaces pertinents de la relation de fermeture (2.7). Le projecteur $\mathcal{P}$ dépend de D_0 (ou des λ_i) à travers les σ_i. Appliqué à tout état D équivalent à D_0 en ce qui concerne les variables macroscopiques ρ^i, il le projette sur D_0 lui-même:

$$\mathcal{P}^\mu{}_\nu\, D^\nu = D^\mu_0\,. \tag{4.7}$$

Géométriquement (fig. 2), il projette ainsi le plan Δ sur D_0. Appliqué à un point quelconque de l'espace des états, il le projette sur le plan tangent à R en D_0, parallèlement à Δ, c'est-à-dire en conservant les coordonnées $(\omega^i; D) = \rho^i$. Il est donc utile non seulement en D_0 mais aussi dans son voisinage. On peut aussi appliquer le projecteur $\mathcal{P}$ à gauche sur une observable; il la projette sur une observable pertinente selon

$$A_\nu \mathcal{P}^\nu{}_\mu = (A\,;\sigma_i)\,\omega^i_\mu \tag{4.8}$$

En particulier, il ne modifie pas les observables pertinentes puisque $\omega^i\mathcal{P} = \omega^i$. Ce projecteur $\mathcal{P}$ permet ainsi de *séparer* formellement *toute observable ou tout état* en la somme d'une partie pertinente et d'une partie microscopique sans intérêt qui doit être éliminée pour passer à la description macroscopique.

La concavité de l'entropie permet de définir dans l'espace des états une *métrique* naturelle[4)], puisque

$$-\frac{\partial^2\, S\,(D)}{\partial D^\mu\,\partial D^\nu} \equiv \mathcal{G}_{\mu\nu} \tag{4.9}$$

est en tout point D une matrice positive. Ceci définit des *distances* et des *angles* dans l'espace des états selon $ds^2 = -d^2S$. Le tenseur (4.3) fournit alors, au signe près, la métrique induite par (4.9)

sur la surface R. L'existence de cette métrique permet d'établir une correspondance canonique entre les espaces des observables et des états, selon

$$\delta D_\mu \equiv \mathcal{G}_{\mu\nu}\delta D^\nu = (\delta \log D)^\mu\,, \tag{4.10}$$

et également de définir des distances et des angles dans l'espace des observables à l'aide du tenseur inverse de $\mathcal{G}_{\mu\nu}$,

$$\mathcal{G}^{\mu\nu} = \frac{\partial^2}{\partial A_\mu \partial A_\nu} \mathrm{Tr}\ \exp\left[-A_\mu \Omega^\mu\right], \tag{4.11}$$

dont (4.2) est une restriction. Avec ces définitions, il est facile de voir que (4.7) aussi bien que (4.8) constituent des *projections orthogonales.* Non seulement la correspondance $D \to D_0$ est une projection sur R au sens des espaces vectoriels, mais l'orthogonalité en D_0 de Δ et de R signifie aussi que D_0 est, parmi les opérateurs densité réduits de R, le plus proche de D.

En introduisant le projecteur $\mathcal{Q}$ complémentaire de $\mathcal{P}$, on sépare D en deux parties

$$D = D_0 + D_1, \quad D_0 = \mathcal{P}D, \quad D_1 = \mathcal{Q}D. \tag{4.12}$$

Ceci permet de récrire l'équation de Liouville–von Neumann (2.11) en termes de D_0 et D_1. On note cependant que D_0 figure indirectement dans (4.12) à travers $\mathcal{P}$ et $\mathcal{Q}$, qui dépendent donc du temps. La forme (4.6) de $\mathcal{P}$ implique $\dot{\mathcal{P}}\mathcal{Q} = 0$, alors que (4.5) implique $\mathcal{P}\dot{\mathcal{P}} = 0$, de sorte que

$$\dot{\mathcal{P}} = -\dot{\mathcal{Q}} = \mathcal{Q}\dot{\mathcal{P}}\mathcal{P}. \tag{4.13}$$

On en déduit les équations

$$\dot{D}_0 - \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P}D_0 - \dot{\mathcal{P}}D_0 = \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}D_1, \tag{4.14}$$

$$\dot{D}_1 - \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}D_1 = -\dot{\mathcal{P}}D_0 + \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}D_0, \tag{4.15}$$

qui *couplent les parties pertinente et non pertinente* de l'opérateur densité. La première de ces équations équivaut au théorème d'Ehrenfest pour les ω^i, écrit sous forme

$$\dot{\rho}^i - \left\langle \omega^i \mathcal{L}\mathcal{P} \right\rangle = \left(\omega^i; \mathcal{L}D_1\right), \tag{4.16}$$

car il revient au même de se donner ρ^i ou D_0.

Afin de trouver des équations fermées pour le mouvement des variables macroscopiques ρ^i, il reste à *éliminer* D_1 en résolvant (4.15). Cette élimination s'effectue formellement en introduisant le superopérateur fonction de Green $\mathcal{W}^\mu{}_\nu(t,t')$ associé au premier membre de (4.15), nul pour $t < t'$ et solution partout de l'équation

$$\left[\frac{d}{dt} - \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t)\right] \mathcal{W}(t,t') = \mathcal{Q}(t)\delta(t-t'). \tag{4.17}$$

Cette équation décrit une *évolution dans l'espace non pertinent.* Le superopérateur $\mathcal{W}$ joue dans cet espace le même rôle que le superopérateur d'évolution dans l'espace complet,

$$\mathcal{U}(t,t') = \mathrm{e}^{\mathcal{L}(t,t')}, \tag{4.18}$$

qui est associé au noyau $d/dt - \mathcal{L}$. On l'appelle le *noyau de mémoire*: il décrit, comme on va le voir, les effets de mémoire dus au couplage entre les variables ρ^i et les variables non pertinentes.

L'intégration de (4.15) s'effectue formellement à l'aide du noyau $\mathcal{W}$. Compte tenu de la condition initiale $D_1(0) = 0$, (4.17) fournit en effet

$$D_1(t) = \int_0^t dt'\, \mathcal{W}(t,t') \left[-\dot{\mathcal{P}}(t') + \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}(t')\right] D_0(t'). \tag{4.19}$$

En reportant (4.19) dans (4.14), on obtient ainsi les *équations de transport généralisées*

$$\begin{aligned} \dot{D}_0 &= \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P}D_0 + \dot{\mathcal{P}}D_0 + \\ &\quad + \int_0^t dt'\, \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}(t)\, \mathcal{W}(t,t') \left[-\dot{\mathcal{P}}(t') + \mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}(t')\right] D_0(t'), \end{aligned} \tag{4.20}$$

où certains projecteurs peuvent être omis, ce qui équivaut à

$$\dot{D}_0 = \mathcal{P}\mathcal{L}D_0 + \dot{\mathcal{P}}D_0 + \int_0^t dt' \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{W}(t,t') \left[-\dot{\mathcal{P}}(t') + \mathcal{Q}(t')\mathcal{L}\right] D_0(t'). \tag{4.20'}$$

Il revient au même d'insérer (4.19) dans (4.16), ce qui donne les équations régissant les ρ^i, dont la donnée équivaut à celle de D_0.

L'équation (4.20) est une équation *intégro-différentielle* pour D_0, qui y figure explicitement et par l'intermédiaire de $\mathcal{P}$ dont $\mathcal{W}$ lui-même dépend. L'élimination de D_1 a ainsi conduit, à partir de $dD/dt = \mathcal{L}D$, à une équation *non linéaire* pour D_0, avec des effets de *retard*, sans différence formelle essentielle entre le cas quantique et le cas *classique.* L'*entropie* $S_{\mathrm{R}}(\rho)$ n'est pas constante, contrairement à $S(D)$, et croît en général. Le premier terme de (4.20) décrit le *couplage direct* entre observables pertinentes. Le second, qui selon (4.13) contient à sa gauche le projecteur $\mathcal{Q}$, est lié à la variation dans le temps des σ_i c'est-à-dire à la rotation du plan tangent à R en D_0; il n'apparaît pas dans les équations (4.16), (4.19) pour $\dot{\rho}^i$. Le dernier terme décrit le *couplage avec l'espace non pertinent*: son facteur $-\dot{\mathcal{P}}+\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P}$ fait passer de l'espace pertinent à l'espace non pertinent au temps t', le noyau $\mathcal{W}(t,t')$ décrit l'évolution dans cet espace de t' à t, et le premier facteur fait ensuite repasser à l'espace pertinent au temps t. On notera que $-\dot{\mathcal{P}}D_0 = -\mathcal{Q}\dot{D}_0$, en conséquence de $\mathcal{Q}D_0 = 0$, de sorte que les derniers facteurs de (4.20) s'écrivent $\left[-\dot{\mathcal{P}} + \mathcal{Q}\mathcal{L}\right] D_0 = \mathcal{Q}\left[-\dot{D}_0 + \mathcal{L}D_0\right]$. Par suite, le terme intégral est petit si D_0 suit une évolution voisine de celle de D, qui est donnée par $-\dot{D}+\mathcal{L}D = 0$.

5 Approximations

Même lorsque les observables ω^i sont en nombre assez petit pour être manipulables, il est hors de question de résoudre l'équation (4.17) pour $\mathcal{W}$, de sorte que l'équation (4.20) n'a qu'un intérêt formel. Des approximations sont nécessaires pour rendre cette équation utile.

Négliger le dernier facteur $\left[-\dot{\mathcal{P}} + \mathcal{Q}\mathcal{L}\right] D_0$ de (4.20) revient à *négliger le couplage* entre les deux types de variables. L'équation de transport qui en résulte exprime l'annulation du premier membre de (4.16). Elle signifie simplement que $\omega^i\mathcal{L}\mathcal{P}$ joue le rôle d'*observable vitesse* associée à ω^i. Les effets du couplage direct entre les ω^i sont alors *instantanés*, et l'on est en présence d'une équation de type *champ moyen.* Dans cette approximation, on trouve selon (3.7)

$$\frac{dS_{\mathrm{R}}(\rho)}{dt} = \lambda_i\dot{\rho}^i = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}\ln D_0\,[H, D_0] = 0, \tag{5.1}$$

de sorte que toute approximation de champ moyen est *non dissipative*: la *dissipation résulte des effets de retard.* L'approximation de *Hartree–Fock dépendant du temps* s'obtient par exemple ici en prenant pour ω^i les observables à un corps. L'approximation de champ moyen associée au choix des variables hydrodynamiques n'est autre que celle du fluide parfait, régi par l'*équation d'Euler* sans transfert de chaleur.

Il existe une circonstance dans laquelle on parvient à prendre en compte avec une erreur négligeable les effets dissipatifs associés au noyau de mémoire. Supposons que les observables pertinentes ont pu être sélectionnées de telle façon que les *échelles de temps* mises en jeu dans l'équation (4.17) *pour $\mathcal{W}$ soient courtes* devant les échelles de temps caractéristiques des $\rho^i(t)$. Ceci suppose en particulier que l'on a inclus parmi les ω^i les variables *conservatives*, les *paramètres d'ordre*, et toute autre variable *collective*; il convient aussi que la séparation entre les deux échelles de temps soit nette. Dans ces conditions, on peut oublier la dépendance dans le temps de $\mathcal{Q}(t)$ dans (4.17) pour des temps $t - t'$ positifs assez courts, et donc écrire

$$\mathcal{W}(t, t') \simeq \mathcal{Q}(t)\exp\left[(t - t')\mathcal{L}\mathcal{Q}(t)\right]. \tag{5.2}$$

Dans cette *approximation de mémoire courte*, $\mathcal{W}(t, t')$ n'est appréciable que sur un intervalle de temps $t - t'$ petit devant l'échelle de temps des $\rho^i(t)$, la même que celle de $\mathcal{Q}(t)$. Plus précisément, (5.2) comprend soit des exponentielles décroissantes, soit des termes oscillants en très grand nombre (compte tenu de la grande taille de l'espace non pertinent), qui *interfèrent destructivement* lorsque $t - t'$ croît. (L'existence d'exponentielles croissantes, associées à des valeurs propres de $\mathcal{L}\mathcal{Q}$ ayant une partie réelle positive, qui traduirait une instabilité dans l'espace $\mathcal{Q}$, est signe d'un choix inadéquat des variables macroscopiques.) Dans (4.20), on peut alors remplacer t' par t dans

$\mathcal{P}(t'), \mathcal{Q}(t')$ et $D_0(t')$, qui varient peu dans la région de t' où $\mathcal{W}(t,t')$ est appréciable. On peut aussi remplacer la borne d'intégration 0 par $-\infty$ puisque l'intégrale sur t' ne porte que sur le voisinage de la borne supérieure t, de sorte que (4.20) se réduit à *l'équation de transport* suivante pour D_0, c'est-à-dire pour les $\rho^i(t)$ (ou les $\lambda_i(t)$) :

$$\dot{D}_0 \simeq \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{P}D_0 + \dot{\mathcal{P}}D_0 + \mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}\frac{1}{-\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}+0}\left(\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{P} - \dot{\mathcal{P}}\right)D_0; \qquad (5.3)$$

le terme infinitésimal $+0$ en dénominateur donne un sens aux valeurs propres imaginaires de $\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}$, qui forment un quasi-continuum.

Tous les termes du second membre de (5.3) sont pris au temps t, de sorte que l'on est passé d'une équation intégro-différentielle avec mémoire à une équation différentielle ordinaire. Le caractère markovien de l'équation de Liouville–von Neumann (2.1), qui s'était perdu dans l'équation exacte (4.20) du fait de l'élimination des degrés de liberté non pertinents, est retrouvé dans l'approximation de mémoire courte (5.3), qui pésente cependant des caractères nouveaux. La courte échelle de temps associée aux variables non pertinentes a permis de remplacer les effets retardés qu'elles engendrent par le dernier terme de (5.3), *instantané* mais *dissipatif.* On peut en effet vérifier que ce terme fait en général croître l'entropie pertinente $S_{\mathrm{R}}(\rho)$, ce qui traduit une perte d'information vers les variables non pertinentes, perte *sans retour* car les temps de récurrence sont gigantesques. En fait, une dérivée négative de $S_{\mathrm{R}}(\rho)$ n'est pas exclue, bien que $S_{\mathrm{R}}(\rho(t))$ soit toujours supérieure à $S_{\mathrm{R}}(\rho(0))$; ceci signalerait simplement un choix inadéquat des variables dynamiques ρ^i, puisque de l'information pourrait alors revenir vers l'espace pertinent depuis certaines *variables cachées* non pertinentes. Il faudrait alors inclure ces dernières dans la description, idée couramment utilisée dans des approches semi-empiriques (par exemple, en mécanique, pour les matériaux à mémoire de forme). Par ailleurs, l'équation de transport (5.3) est *non linéaire*, à l'inverse de l'équation de départ.

On trouve dans la littérature de très nombreux exemples d'équations de transport du type (5.3). Selon le contexte, et selon le choix des variables pertinentes, elles portent des noms divers, mais on pourra toujours y reconnaître sous-jacentes les idées ci-dessus. Lorsque les ω^i sont des *projecteurs*, les $\rho^i = \langle\omega^i\rangle$ s'interprètent comme des *probabilités*, et leur dynamique (5.3) est celle d'*équations de bilan*, à la *Pauli.* Les équations de transport habituelles, du type de l'*hydrodynamique* ou de la *thermodynamique hors équilibre,* correspondent au choix, pour les ρ^i, de variables *conservatives locales.* Le terme dissipatif de (5.3) décrit alors des *transferts*, entre éléments de volume voisins, de chaleur, de particules ou de moment, ce qui définit dans une approximation linéaire les coefficients de transport correspondants (conductivité, diffusion, viscosité). Dans la *description de Boltzmann*, le dernier terme de (5.3) s'identifie au *terme de collision.* Dans la théorie du *mouvement Brownien*, ou bien dans la description de systèmes *non*

isolés ou ouverts, qui échangent de l'énergie, du moment ou des particules avec le milieu ambiant, ce dernier doit être éliminé de la description; on tombe alors sur des équations à la *Fokker–Planck*, ou sur des équations de *relaxation* (comme en résonance magnétique), ou sur un calcul de *largeurs de raies.*

Le formalisme peut s'étendre à la dynamique de Heisenberg des observables[4)], et conduit ainsi pour les $A(t)$ à des équations du type *Langevin*, où la "force" dA/dt se décompose en une partie cohérente incluant *champ moyen* et *friction* comme dans (5.3), plus une *partie aléatoire* décrivant l'apparition au cours du temps de composantes non pertinentes dans $A(t)$.

Dans la pratique, le passage de l'équation exacte (4.20) à une équation de transport instantanée approchée (5.3) s'effectue généralement en court-circuitant la résolution (5.2) de l'équation (4.17) pour le noyau de mémoire, résolution qui reste le plus souvent impraticable. Des approximations supplémentaires, *perturbatives* (en termes des *interactions* ou en termes de l'*écart à l'équilibre*), *itératives*, *variationnelles*, sont effectuées, où la considération des échelles de temps joue un rôle capital. La section 6 en présentera brièvement deux exemples.

Des approches plus grossières modélisent le dernier terme de (5.3) à l'aide de coefficients empiriques. Traiter par exemple l'ensemble des variables non pertinentes comme des *variables aléatoires* auxquelles est associé un bruit blanc sans structure revient à supposer que

$$\mathcal{W}(t,t') \simeq \mathcal{Q}(t)\mathrm{e}^{-(t-t')/\tau} \simeq \tau\mathcal{Q}(t)\delta(t-t'); \tag{5.4}$$

ceci remplace le facteur compliqué $[-\mathcal{Q}\mathcal{L}\mathcal{Q}+0]^{-1}$ de (5.3) par un paramètre ajustable τ, interprété comme un temps de mémoire ou une intensité de bruit, ce qui donne

$$\dot{D}_0 \simeq \left(\mathcal{P}\mathcal{L}+\dot{\mathcal{P}}\right)D_0 + \tau\mathcal{P}\mathcal{L}\left(\mathcal{Q}\mathcal{L}-\dot{\mathcal{P}}\right)D_0. \tag{5.5}$$

Une autre méthode d'approximation, celle des *projections répétées*, consiste à déterminer $D_0(t)$ en des temps successifs $t = 0, \tau, 2\tau, ..., n\tau, ...$. La valeur de $D_0(n\tau+\tau)$ dépend de $D_0(n\tau)$ et de $D_1(n\tau)$, d'une manière que l'on peut déterminer en résolvant les équations (4.14), (4.15) dans l'intervalle $n\tau < t < n\tau+\tau$. Cependant, si τ est choisi suffisamment grand, dépassant le temps de mémoire, $D_0(n\tau+\tau)$ ne dépend guère de $D_1(n\tau)$, de sorte que l'on peut simplifier la résolution en remplaçant $D_1(n\tau)$ par 0. Dans ces conditions, la trajectoire de $D(t)$ sur la fig.2 équivaut approximativement, pour ce qui concerne $D_0(t)$, à une trajectoire en dents de scie, obtenue par projections successives aux instants $t = \tau, 2\tau, ..., n\tau, ...$. Une approximation supplémentaire, plus grossière, consiste alors à admettre que τ est assez petit pour justifier un développement de Taylor de $D_0(n\tau+\tau)-D_0(n\tau)$ au second ordre en puissances de τ. Ceci donne, en utilisant (4.17), (4.20):

$$D_0(n\tau+\tau)-D_0(n\tau)\simeq\tau\left(\mathcal{P}\mathcal{L}+\dot{\mathcal{P}}\right)D_0+$$
$$+\frac{\tau^2}{2}\left[\left(\dot{\mathcal{P}}\mathcal{L}+\ddot{\mathcal{P}}\right)D_0+\left(\mathcal{P}\mathcal{L}+\dot{\mathcal{P}}\right)D_0+\mathcal{P}\mathcal{L}\mathcal{Q}\left(\mathcal{L}\mathcal{P}-\dot{\mathcal{P}}\right)D_0\right], \qquad (5.6)$$

où le second membre est calculé en $t=n\tau$. On note que si une fonction f satisfait à l'équation aux différences finies

$$f(t+\tau)-f(t)\equiv\left(\exp\tau\frac{d}{dt}-1\right)f(t)=\tau g(t,\tau), \qquad (5.7)$$

elle satisfait aussi à l'équation différentielle

$$\frac{df(t)}{dt}=\left(\exp\tau\frac{d}{dt}-1\right)^{-1}\tau\frac{d}{dt}g(t,\tau)\approx g(t,\tau)-\frac{\tau}{2}\frac{dg(t,\tau)}{dt}+\ldots, \qquad (5.8)$$

qui fait intervenir la série de Bernoulli, développement asymptotique de $x/(e^x-1)$. Par suite, (5.6) équivaut, à l'ordre 1 en τ, à

$$\dot{D}_0=(\mathcal{P}\mathcal{L}+\dot{\mathcal{P}})D_0+\frac{\tau}{2}\mathcal{P}\mathcal{L}(\mathcal{Q}\mathcal{L}-\dot{\mathcal{P}})D_0. \qquad (5.9)$$

Bien que l'interprétation en soit différente, on retrouve la même équation approchée (5.5) que dans la méthode du bruit blanc; le paramètre ajustable τ représente ici un compromis entre un intervalle assez petit pour que le développement (5.6) soit valable et un temps supérieur au délai de mémoire. En poussant les développements (5.6)–(5.9) à l'ordre suivant, on pourrait améliorer l'approximation; en particulier, le fait que celle-ci dépende peu de τ peut permettre de déterminer une valeur optimale pour ce paramètre.

6 L'exemple de l'équation de Boltzmann

L'étude des gaz classiques hors équilibre[1)] fait appel à deux réductions successives de la description, schématisées sur la fig.3 ci-dessus. La *première réduction* conduit à la description de Boltzmann. A partir de l'équation de Liouville pour D, qui équivaut à la hiérarchie BBGKY, la méthode de projection, appliquée aux observables pertinentes (2.22), conduit pour $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$ à une équation exacte (4.16), (4.19) avec mémoire. On peut montrer directement que l'approximation de mémoire courte (5.3) devient asymptotiquement exacte à la limite où les distances entre particules (ou le libre parcours) deviennent grandes devant la portée des forces, et qu'elle aboutit alors pour $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$ à l'équation de Boltzmann (6.3). Le premier membre de (4.16) s'identifie aux

termes de dérive, et son second membre est approché par les termes de collision de cette équation de Boltzmann. En fait, la méthode la plus courante pour établir l'équation de Boltzmann consiste à faire un simple *bilan*, à des instants successifs, du nombre de particules *dans un élément de volume* de l'espace des phases à une particule. Cependant, on ne peut effectuer un tel bilan que si l'intervalle entre ces instants est grand devant la durée d'une collision, situation qui autorise l'emploi de la seule *section efficace* pour caractériser chaque collision. L'équation de Boltzmann n'est donc en toute rigueur pas une véritable équation différentielle comme l'est la hiérarchie BBGKY, puisque l'élément dt qui y figure n'est pas infinitésimal mais grand devant la durée d'une collision. Elle suppose une approximation de *mémoire courte* pour les grandeurs autres que $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$. De plus, le bilan ne peut se faire que dans des éléments de volume grands devant la taille des particules ou la portée des forces, qui doit donc être négligeable devant toutes les autres longueurs caractéristiques. De nombreux travaux ont permis d'établir en partant de la physique microscopique comment l'équation de Boltzmann doit être modifiée lorsque la *densité* augmente, ou (en représentation de Wigner) lorsque la nature *quantique* des particules se met à jouer.

La *seconde réduction* de la description, schématisée par la partie droite de la fig.3, mène à la description hydrodynamique, en termes des densités (3.3). Afin d'établir les équations du mouvement pour celles-ci, il est inutile de remonter à l'équation de Liouville ou à la hiérarchie BBGKY; il suffit de partir, selon le bas du schéma de la fig.3, de la description de Boltzmann. La densité réduite $f(\mathbf{r},\mathbf{p})$ joue alors le même rôle que D dans la méthode de projection, l'équation de Boltzmann le même rôle que l'équation de Liouville; les équations (3.3) font passer de f aux variables réduites ρ_k, et D_0 est remplacé par une densité réduite à un corps non biaisée $f_0(\mathbf{r},\mathbf{p})$, de la même forme que (3.4):

$$f_0(\mathbf{r},\mathbf{p}) = \frac{1}{h^3}\exp\left[-\lambda_N - \lambda_E\frac{p^2}{2m} - \lambda_{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{p}\right]. \tag{6.1}$$

Les multiplicateurs de Lagrange λ_k (où $k = E, N$ ou $\mathbf{P}$) sont ici des fonctions de la position $\mathbf{r}$ et du temps, et s'interprètent en termes des variables intensives locales de la thermodynamique, température T, potentiel chimique μ et vitesse hydrodynamique $\mathbf{u}$, selon

$$\lambda_N + \lambda_E\frac{p^2}{2m} + \lambda_{\mathbf{P}}\cdot\mathbf{p} \equiv \frac{(\mathbf{p}-m\mathbf{u})^2}{2mT} - \frac{\mu}{T}. \tag{6.2}$$

Il revient au même de se donner f_0, les λ_k ou les ρ_k; ces *variables conjuguées* λ et ρ sont liées en chaque point et à chaque instant par les équations d'état de la *thermostatique*. Le fait que $f_0 = \mathcal{P}f$ soit la projection de f s'exprime en écrivant que $f_1 \equiv f - f_0$ ne contribue pas aux densités ρ, ou que les relations (3.3) peuvent s'écrire indifféremment avec f ou avec f_0. Notre but est de déterminer la dynamique des ρ_k à l'aide de la méthode de projection.

L'équation de départ est ici l'équation de Boltzmann

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f = \mathcal{J}(f), \tag{6.3}$$

où le terme de collision $\mathcal{J}$ est proportionnel à la section efficace de diffusion et comprend des intégrations sur les moments en jeu. Sa projection sur l'espace pertinent est nulle, puisque

$$\int d^3\mathbf{p}\mathcal{J} = \int d^3\mathbf{p}\frac{p^2}{2m}\mathcal{J} = \int d^3\mathbf{p}\ \mathbf{p}\mathcal{J} = 0. \tag{6.4}$$

Ces égalités expriment qu'à l'échelle de Boltzmann, les collisions conservent le nombre de particules, l'énergie et le moment. L'intégration de (6.3) avec les poids de (6.4) conduit donc pour les cinq variables $N, E, \mathbf{P}$ aux cinq *lois de conservation* macroscopiques

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0, \tag{6.5}$$

où les densités de courant sont définies par

$$\mathbf{J}_N = \int d^3\mathbf{p} f \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \mathbf{J}_E = \int d^3\mathbf{p}\frac{p^2}{2m} f \frac{\mathbf{p}}{m}, \quad \mathbf{J}_{\mathbf{P}} = \int d^3\mathbf{p}\,\mathbf{p} f \frac{\mathbf{p}}{m}. \tag{6.6}$$

L'existence de ces lois de conservation permet de simplifier l'établissement des équations de transport macroscopiques, puisque selon (4.16) et (6.5), il suffit de déterminer à chaque instant les $\mathbf{J}$, ce que nous allons faire ci-après; les équations dynamiques proprement dites, contenant une dérivée par rapport au temps, sont les équations de conservation (6.5).

Les densités de courant (6.6), où $f = f_0 + f_1$, comprennent en chaque point $\mathbf{r}$ et à chaque instant une contribution triviale $\mathbf{J}^0$ associée à f_0, la même que si le gaz était en mouvement uniforme à la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$. En particulier, on a $\mathbf{J}_N^0 = \rho_N\,\mathbf{u}$ et $\mathbf{J}_E^0 = \rho_E\,\mathbf{u}$. Le courant $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}$ associé au moment s'identifie en vertu de (6.5), écrit pour la densité de moment $\rho_{\mathbf{P}}$, au tenseur des contraintes. Sa partie triviale $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}^0$ est la somme du terme $m\mathbf{uu}$ associé au mouvement uniforme et du terme de pression d'équilibre $\rho_N T(\mathbf{r}, t)$. Les contributions restantes, celles de f_1 à $\mathbf{J}_E$ et à $\mathbf{J}_{\mathbf{P}}$, s'obtiendraient rigoureusement en exprimant f_1 en fonction de f_0 pris aux instants antérieurs, ce qui équivaut à (4.19); ceci fournirait une expression exacte, mais comportant une mémoire, pour les courants. Cependant, on s'attend, à la limite où le temps moyen entre collisions est faible devant les échelles de temps caractéristiques des $\rho(t)$, à ce que l'approximation instantanée soit valable. On cherche donc à construire une approximation fournissant $f_1(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ en fonction de $f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ au même instant.

Ceci est réalisé par la *méthode de Chapman et Enskog*[1)], qui repose sur les idées générales de la méthode de *projection,* combinées à des propriétés liées aux lois de *conservation.* Nous nous

contenterons ici de l'esquisser. Le régime linéaire d'intérêt correspond à la *limite* $f_1 \ll f_0$, dont on peut voir qu'elle correspond à des échelles spatio-temporelles pour les $\rho(\mathbf{r}, t)$ grandes devant le libre parcours et le délai entre collisions. Plus précisément, si on considère que f_0 est d'ordre 0 et f_1 d'ordre 1, on est conduit à admettre que le terme de collision $\mathcal{J}$ de (6.3) contient un coefficient grand, d'ordre -1. On vérifie que ce terme a pour tout f_0 de la forme (6.1) la propriété

$$\mathcal{J}(f_0) = 0. \tag{6.7}$$

Par suite, à l'ordre -1 dominant, l'équation de Boltzmann (6.3) se réduit à (6.7), la densité en phase f a une forme (6.1) où les λ_k dépendent de $\mathbf{r}$ et t de façon restant à déterminer, et les courants se réduisent à la contribution $\mathbf{J}^0$ de f_0. Les équations de conservation (6.5) se réduisent alors à

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\mathbf{J}^0 = 0. \tag{6.8}$$

Ces équations déterminent approximativement la dépendance dans le temps des ρ_k (ou des λ_k). Elles expriment l'absence de transfert de chaleur et l'absence de viscosité, qui conduit à l'équation d'Euler. L'approximation de *champ moyen* est ainsi retrouvée comme ordre dominant de la méthode de Chapman et Enskog.

A l'ordre 0 en f_1 suivant, l'équation de Boltzmann devient

$$\frac{\partial f_0}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} f_0 = \mathcal{K} f_1, \tag{6.9}$$

où $\mathcal{K}$ est un noyau intégral en $(\mathbf{p}, \mathbf{p}')$ obtenu en développant $\mathcal{J}(f_0 + f_1)$ à l'ordre le plus bas en f_1. Ce noyau dépend de $f_0(\mathbf{r}, t)$ au point et à l'instant considérés. Le premier terme de (6.9) se déduit de (6.8) puisque f_0 ne dépend que des λ, c'est-à-dire que des ρ. Le premier membre de (6.9) est donc une combinaison linéaire des gradients des λ. Par inversion du noyau $\mathcal{K}$, on exprime f_1, et par suite les courants à l'ordre 1, en fonction de ces gradients. Les équations de conservation (6.5), alliées aux relations linéaires ainsi obtenues entre les $\mathbf{J}$ et les affinités $\nabla\lambda$, sont les équations macroscopiques cherchées. Ceci *justifie* dans le cas des gaz, à la limite considérée, la loi de *Fourier* pour la conduction de la chaleur et les équations de *Navier–Stokes*, et ceci fournit l'expression des *coefficients de transport* correspondants en termes de la section efficace de collision à laquelle $\mathcal{K}$ est proportionnel.

L'entropie (3.8) associée à la description de Boltzmann croît lorsque f évolue selon l'équation de Boltzmann (6.3). Ce résultat, facile à démontrer[1)], constitue le *théorème H* de Boltzmann, dont la signification est la suivante. Les corrélations, qui sont éliminées de l'équation de Boltzmann et qui se créent progressivement au cours du temps, emportent de l'ordre ou de l'information; par suite, le désordre qui est associé à la seule connaissance de f croît au cours du temps.

Si les gradients des ρ sont suffisamment faibles, l'entropie thermodynamique (calculée comme à l'équilibre pour chaque élément de volume) croît aussi, conformément au *deuxième principe* sous sa forme dynamique de Clausius–Duhem, qui trouve ainsi une justification microscopique. Mais les deux entropies S_{B} et S_{th} ne s'identifient entre elles que dans cette limite des gradients faibles. Leurs croissances respectives mesurent l'irréversibilité des évolutions aux deux échelles de Boltzmann et hydrodynamique. Pourtant, l'évolution microscopique est réversible. Cette opposition constitue le *paradoxe de l'irréversibilité*, dont l'élucidation fait appel *à la fois à la statistique et à la complexité de l'évolution* microscopique[1]. Une décroissance de S_{th} alors que S_{B} croît signalerait que la description hydrodynamique est mauvaise.

On notera en conclusion que la méthode de projection, générale et systématique, présente comme le montre l'exemple du gaz une grande souplesse liée au choix des observables ω^i. Ce choix ne peut cependant être justifié qu'a posteriori, après analyse des échelles de temps en jeu. On notera aussi que non seulement les divers outils utilisés, opérateur densité réduit D_0, projecteur $\mathcal{P}$, noyau de mémoire $\mathcal{W}$, mais les concepts eux-mêmes, dépendent du choix des ω^i. Par exemple, la "température", inverse du multiplicateur associé à l'énergie, dépend du choix des autres variables. Il en est de même de l'entropie pertinente $S_{\mathrm{R}}(\rho)$, comme le montre la distinction faite ci-dessus entre S_{th} et S_{B}, et par suite de la dissipation, qui dépend de la description réduite, et qui est d'autant plus faible que celle-ci est plus détaillée.

Références

1) R. Balian, *From Microphysics to Macrophysics, Methods and Applications of Statistical Physics*, deux volumes (Springer-Verlag 1991, 1992). Une version française est en préparation.

2) R. Balian, *Collective variables and dissipation*, dans *Heavy Ion Collisions*, NATO ASI Serie B, vol. 130, Cargèse 1984, Bonche et al, eds (Plenum Press 1986).

3) R. Balian, *Statistical mechanics and the maximum entropy method*, dans *From Statistical Physics to Statistical Inference and Back*, NATO ASI Serie C, vol. 428, Cargèse 1992, Grassberger et Nadal, eds (Kluwer 1994).

4) R. Balian, Y. Alhassid, H. Reinhardt, *Dissipation in many-body systems: a geometric approach based on information theory*, Phys. Reports **131** (1986) 1.

5) J. Rau and B. Müller, *From reversible quantum microdynamics to irreversible quantum transport*, Phys. Reports, à paraître.